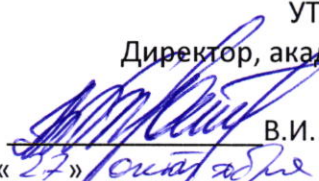


**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
«Федеральный исследовательский центр
«Институт катализа им. Г.К. Борескова
Сибирского отделения Российской академии наук»
(ИК СО РАН, Институт катализа СО РАН)**

УТВЕРЖДАЮ
Директор, академик РАН

В.И. Бухтияров
«27» октября 2023 г.

**Билеты к вступительному испытанию по научной специальности
2.6.13 «Процессы и аппараты химических технологий»**

Билет 1

1. Предмет науки “Теоретические основы и методы математического моделирования химических процессов и аппаратов” и ее место в ряду других физико-химических и технических наук. Что такое математическое моделирование? История развития.
2. Зависимость константы скорости от температуры. Энергия активации. Более сложные формы кинетических уравнений типа Ленгмюра-Хиншельвуда. Их вывод на основе представлений о детальном механизме реакции.
3. Зерно катализатора. Квазигомогенная модель, ее основные предпосылки (внутренняя поверхность намного больше наружной, реакция происходит в основном на внутренней поверхности, радиус пор значительно меньше размера гранул катализатора, поры равномерно пронизывают зерно катализатора). Геометрия зерна (пластина, цилиндр, шар).

Билет 2

1. Роль математического моделирования в создании новых процессов и модернизации существующих. Современные методы исследования процессов и аппаратов, применение компьютерных технологий. Современное состояние химической промышленности в России и в мире.
2. Закон действующих масс – как простой способ выражения скорости брутто-реакции. Его полезность и ограничения. Понятия “константа скорости”, “порядок реакции”.
3. Зерно катализатора. Внешняя диффузия. Неоднородная структура потока в слое. Процессы тепло-массообмена потока с внешней поверхностью зерна. Наблюдаемая скорость процесса с учетом внешней диффузии.

Билет 3

1. Аппаратурно-процессные единицы (АПЕ) - определение понятия. АПЕ периодического и непрерывного действия. Их особенности. Цикличность периодического процесса. Ступенчатые и непрерывные процессы. Основные физические величины, описывающие элемент процесса, их размерности.

2. Современные подходы к построению кинетических моделей. Теория стационарных реакций Хориути-Темкина. Феноменологические кинетические модели. Прямая и обратная кинетические задачи как первый этап математического моделирования химических реакторов. Решение обратных задач.

3. Объект – “холодный” аппарат, материальные и тепловые потоки в реакторе без учета химических реакций. Конечный результат – адекватная гидродинамическая модель аппарата – уравнение, характеризующее изменение концентрации вещества и температуры потока, которые обусловлены только движением.

Билет 4

1. Принципиальная схема процесса: Химический состав исходного сырья, промежуточных и конечных продуктов, последовательность отдельных процессов, типы аппаратов и машин.

2. Понятие кинетическая модель. Этапы кинетических исследований. Проточный и безградиентный методы получения данных о кинетике каталитических реакций. Их преимущества и недостатки.

3. Классификация химических реакторов по типу фаз: однофазные, двух и многофазные, по типу слоя катализатора: неподвижный слой, псевдооживленный слой. Классификация реакторов по конструктивным признакам: неподвижный слой, трубчатый реактор, псевдооживленный слой.

Билет 5

1. Способы передачи тепла. Теплопроводность, закон Фурье. Дифференциальное уравнение теплопроводности в стационарном и нестационарном режимах.

2. Число независимых брутто-реакций, метод его определения. Фундаментальное балансовое соотношение (закон сохранения химических элементов) для плотностей источников.

3. Основные принципы расчета химических реакторов. Физическое и математическое моделирование. Проблемы масштабного перехода. Методы построения и типы математических моделей. Стохастические и детерминированные модели. Иерархическая структура модели.

Билет 6

1. Коэффициенты теплопроводности и температуропроводности. Теплопроводность однослойной и многослойной стенки.

2. Сложные реакции как совокупность простых стехиометрических стадий. Параллельные и последовательные реакции.

3. Зерно катализатора. Внутренняя диффузия. Первый и второй законы Фика как теоретическая основа описания процессов внутренней диффузии. Анализ зерна катализатора. Эффективная (наблюдаемая) константа скорости. Эффективный коэффициент диффузии, и теплопроводности.

Билет 7

1. Лучистый теплообмен. Конвективный теплообмен. Естественная и вынужденная конвекция. Дифференциальное уравнение конвективного теплообмена. Основное уравнение теплоотдачи. Передача тепла при изменении агрегатного состояния. Теплообмен при кипении.

2. Разница и аналогия между скоростью реакции и плотностью источника. Общая формула для выражения плотности источников компонентов. Понятия координата реакции и степени превращения.

3. Общие сведения о химических процессах; их место и значение в общей технологической схеме химических производств. Химические реакторы, их классификация. Влияние гидродинамических, тепловых и массообменных факторов на основные характеристики химического реактора.

Билет 8

1. Теплопередача через стенку. Основное уравнение теплопередачи. Теплопередача через плоскую однослойную и многослойную стенку.
2. Понятие ключевых (зависимых) и неключевых (независимых) компонентов, источников, балансовые связи между ними.
3. Промышленный катализ, области применения и значение. Роль катализа в развитии химической и нефтеперерабатывающей промышленности. Гомогенные и гетерогенные процессы.

Билет 9

1. Определение температурного напора при прямотоке и противотоке теплоносителей. Принцип сложения термических сопротивлений. Влияние режимов движения на интенсивность теплопередачи.
2. Стехиометрия. Стехиометрическая и атомная матрица. Баланс химических элементов. Понятия простой стехиометрической брутто-реакции, и ее скорости. Понятие "плотности источника" компонента.
3. Классификация химических реакторов: по тепловому режиму: изотермические, адиабатические, политропические, по гидродинамическому режиму: идеальное смешение, идеальное вытеснение, промежуточный режим.

Билет 10

1. Теплообменные аппараты. Конструкции теплообменных аппаратов, их классификация. Принципы расчета теплообменников. Поверхностные теплообменники: кожухотрубные, труба в трубе, пластинчатые. Воздушные холодильники. Котлы-утилизаторы.
2. Этап кинетического анализа: расчет кинетических констант (решение обратной задачи). Дискриминация альтернативных кинетических моделей. Многовариантность модели.
3. Типовые модели движения потока: Идеальное перемешивание, идеальное вытеснение. Типовые (идеальные) модели реакторов.

Билет 11

1. Молекулярная диффузия. Феноменологическая теория молекулярной диффузии. Диффузия в жидкостях.
2. Этап кинетического анализа: проведение предварительно спланированных экспериментов. Лабораторные кинетические установки, их разновидности.
3. Типовые модели движения потока: Диффузионная модель, ячеечная модель, комбинированные модели. Уравнения приведенных разновидностей моделей.

Билет 12

1. Диффузия в пористых материалах. Уравнения скоростей для молекулярной диффузии.
2. Этап кинетического анализа: предварительные исследования – формирование вида уравнения скорости (закон действующих масс, закон действующих поверхностей, разумные предположения о детальном механизме реакции).
3. Периодически действующие реакторы закрытого типа. Область их применения. Математическая модель изотермического и адиабатического реактора.

Билет 13

1. Турбулентность, турбулентная вязкость, турбулентная диффузия, коэффициент турбулентной диффузии. Турбулентные числа Шмидта и Прандтля. Осевое рассеяние в трубчатых и насадочных аппаратах.
2. Кинетический анализ. Объект – совокупность химических превращений исходных веществ в целевые и побочные продукты. Конечный результат – адекватная кинетическая модель (кинетические уравнения химических реакций, параметры кинетических уравнений).
3. Периодически действующие реакторы закрытого типа. Аналитические решения уравнения модели для одной реакции, скорость которой описывается уравнением $r = kc^n$, $n=0, 0.5, 1, 2$. Выражение для степени превращения в зависимости от продолжительности процесса.

Билет 14

1. Массообмен на границе раздела фаз. Модель неподвижной пленки. Модель проникания. Теория обновления поверхности. Коэффициент массоотдачи, формы его выражения. Скорость массопередачи на поверхностях с простой конфигурацией: плоские поверхности, стекающие пленки жидкости.

2. Расчет равновесного состава реакционной смеси. Понятие химической переменной или координаты реакции. Формулировка замкнутой, независимой системы уравнений для решения задачи.

3. Проточные реакторы идеального смешения. Область их применения. Математическая модель изотермического, адиабатического реактора, и реактора с отводом (подводом) тепла.

Билет 15

1. Расчет коэффициентов массопереноса (критериальные уравнения) между жидкостью и твердой сферой: неподвижная насадка, твердые частицы, взвешенные в сосудах с мешалками. Капли, пузыри.

2. Зависимость константы равновесия от температуры. Сдвиг равновесия при изменении температуры и давления. Установление химического равновесия в адиабатических условиях.

3. Проточные реакторы идеального смешения. Понятие условного (фиктивного) времени контакта, способы его выражения. Как учитывать в модели контракцию (изменение мольного потока вещества) в ходе реакции? Аналитические решения уравнения модели для одной реакции, скорость которой описывается уравнением $r = kc^n$, $n=1$.

Билет 16

1. Фазовые равновесия: Законы Рауля и Генри, области их применимости. Уравнения состояния для реальных флюидов (газов, жидкостей).

2. Расчет констант равновесия по данным о коэффициенте фугитивности вещества i в газовой смеси (Кф). Определение K_p через парциальные давления. Определение K_y через мольные доли. Связь между K_p , Кф, K_p и K_y .

3. Проточные реакторы идеального вытеснения. Область их применения. Математическая модель изотермического, адиабатического реактора, и реактора с отводом (подводом) тепла.

Билет 17

1. Понятие фугитивности (активности). Термодинамические условия фазового равновесия многокомпонентных смесей. Математическая модель, балансовые ограничения.

2. Расчет констант равновесия по данным стандартных термодинамических таблиц величин ΔG^0 – изменения стандартной энергии Гиббса реакции (K_p).

3. Проточные реакторы идеального вытеснения. Понятие условного времени контакта, способы его выражения. Как учитывать в модели контракцию (изменение мольного потока вещества) в ходе реакции? Аналитические решения уравнения модели для одной реакции, скорость которой описывается уравнением $r = kc^n$, $n=0, 0.5, 1, 2$.

Билет 18

1. Абсорбция, десорбция, испарение, конденсация в отдельной равновесной ступени, условия фазового равновесия. Уравнения материального баланса.

2. Понятие химическое равновесие. Глубина протекания реакции. Эффективность работы слоя катализатора, реакторного блока. Прогноз глубины протекания процесса. Подбор технологических параметров для сдвига равновесия.

3. Реакторы с неподвижным слоем катализатора. Адиабатический, трубчатый, многослойный, области их применения. Основы гидродинамики зернистых слоев. Гидравлические режимы движения реагентов. Распределение реагентов в аппаратах. Неоднородность потоков.

Билет 19

1. Характеристика типов адсорбции, физические основы процесса адсорбции. Физическая адсорбция и хемосорбция. Изотермы адсорбции Ленгмюра.
2. Фугитивность, активность, коэффициенты фугитивности и активности. Коэффициент молекулярной и кнудсеновской диффузии. Динамический коэффициент вязкости.
3. Реакторы с псевдооживленным слоем, их структура. Понятие начало псевдооживления, число псевдооживления. Реакторы с движущимся слоем.

Билет 20

1. Типы адсорбентов. Теплота адсорбции. Скорость адсорбции. Уравнения адсорбционных изотерм. Изотерма Ленгмюра, ее математический вывод, упрощающие допущения.
2. Методы расчета физико-химических свойств. Физико-химические свойства газовых смесей. Изменение стандартной энергии Гиббса реакции, мольная теплоемкость, энтальпия. Их расчет по табличным термодинамическим данным.
3. Двух- и трехфазные реакторы газ-жидкость и газ-жидкость-твердый катализатор. Барботажные слои. Массообмен от пузыря газа к жидкости. Массообмен от жидкости к поверхности твердой частицы. Наблюдаемая скорость реакции, лимитирующая стадия процесса.

Список литературы для подготовки

Основная литература

1. Бенедек П., Ласло А. Научные основы химической технологии. Л.: Химия, 1979. - 376 с.
2. Кравцов А.В., Новиков А.А., Коваль П.И. Компьютерный анализ технологических процессов. Новосибирск, "Наука", Сибирское предприятие РАН. 1998.
3. Бесков В.С., Флокк В. Моделирование каталитических процессов и реакторов. – М.: Химия, 1991.
4. Бесков В.С., Сафронов В.С. Общая химическая технология и основы промышленной экологии. –М.: Химия, 1999. – 472 с.
5. Боресков Г.К. Гетерогенный катализ. – Новосибирск, Наука, 1986.
6. Слинко М.Г. Пленарные лекции конференций по химическим реакторам: "Химреактор -I" - "Химреактор-III", Новосибирск, 1996.
7. Йоффе И.И., Письмен Л.М. Инженерная химия гетерогенного катализа. – Л.: Химия, 1972. – 462 с.
8. Арис Р. Анализ процессов в химических реакторах. – Л.: Химия, 1967. – 328 с.
9. Левеншпиль О. Инженерное оформление химических процессов. М.: Химия, 1969. – 260 с.
10. Кафаров В.В., Глебов М.Б. Математическое моделирование основных процессов химических производств. – М.: Высшая школа, 1991, - 400 с.
11. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. – М.: Наука, 1967, - 492 с.
12. Карапетянц М.Х. Химическая термодинамика. Изд. 3-е, пер. и доп. М.: Химия, 1975.– 584 с.
13. Термодинамика равновесия жидкость-пар. Под ред. А.Г. Морачевского. Л.:Химия, 1989, - 344 с.

Дополнительная литература

1. Sandler S.I. Chemical and Engineering Thermodynamics. John Wiley & Sons, Inc. 1999.
2. Levenspiel O. The Chemical Reactor Omnibook. – Oregon State University, Corvallis, Oregon, 1993.
3. R. Aris, Ends and beginnings in the mathematical modelling of chemical engineering systems, Chemical Engineering Science, v. 48, No 14, pp. 2507 -2517, 1993.